

**КРИСТАЛЛИЧЕСКАЯ СТРУКТУРА И ФИЗИКО-ХИМИЧЕСКИЕ  
СВОЙСТВА ТВЕРДЫХ РАСТВОРОВ  $(\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x)_{0.975}\text{NiO}_4$** 

Хасанов А.Ф.<sup>(1)</sup>, Пикалова Е.Ю.<sup>(1,2)</sup>, Богданович Н.М.<sup>(2)</sup>, Филонова Е.А.<sup>(1)</sup>

<sup>(1)</sup> Уральский федеральный университет

620002, г. Екатеринбург, ул. Мира, д. 19

<sup>(2)</sup> Институт высокотемпературной электрохимии УрО РАН

620137, г. Екатеринбург, ул. Академическая, д. 20

Замещенные никелаты лантаноидов ряда Раддлесдена-Поппера  $\text{Ln}_2\text{NiO}_{4+\delta}$  ( $\text{Ln} = \text{La}, \text{Pr}, \text{Nd}$ ) являются объектами пристального изучения в связи с потенциальной возможностью их применения в качестве катодов в среднетемпературных твердооксидных топливных элементах (ТОТЭ). Анализ литературы показывает, что наименее изученной является Ca-замещенная система с  $\text{Ln} = \text{Nd}$ . В настоящей работе проведены исследования кристаллической структуры, электропроводности и термических свойств Nd, Ca-дефицитных твердых растворов  $\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x\text{NiO}_{4+\delta}$  с целью выявления факторов, оказывающих влияние на стабильность электродов.

Синтез образцов  $(\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x)_{0.975}\text{NiO}_{4+\delta}$  проводили по полухимической технологии. После перемешивания компонентов в барабане планетарной мельницы САНД в изопропиловом спирте в смесь добавляли избыток гидроксида аммония. Полученный осадок высушивали и прокаливали в несколько стадий в температурном интервале 600–1100°C. Окончательный синтез проводили при температуре 1150–1250°C и пятичасовой изотермической выдержке.

Фазовый состав образцов исследовали методом РФА при комнатной температуре с использованием дифрактометра SHIMADZU XRD-7000 в  $\text{Cu/K}\alpha$ -излучении в интервале углов  $15 \leq 2\theta \leq 85$  с выдержкой в каждой точке 5с. Уточнение кристаллоструктурных параметров проводили методом Ритвелда с использованием программного пакета Fullprof Suite. Для исследований электропроводности и термического расширения из порошков  $(\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x)_{0.975}\text{NiO}_{4+\delta}$  методом полусухого прессования изготавливали компактные образцы. Измерение проводимости компактных образцов проводили четырех-зондовым методом на постоянном токе в воздушной среде в интервале температур 300–900°C с помощью автоматической системы Zirconia-318. Линейное расширение образцов было изучено дилатометрическим методом с использованием кварцевого дилатометра Tesatron ТТ-80) среде в интервале температур 25–800°C.

Установлено, что допирование кальцием приводит к стабилизации тетрагональной структуры  $(\text{Nd}_{2-x}\text{Ca}_x)_{0.975}\text{NiO}_{4+\delta}$ , а также к увеличению электропроводности. Сравнение значений ЛКТР для всех Ca-замещенных систем  $\text{Ln}_2\text{NiO}_{4+\delta}$  показывает, что никелаты неодима имеют значения ЛКТР, близкие к таковым для La-систем, и ниже, чем у Pr-систем.

*Работа выполнена при финансовой поддержке РФФИ (проект № 16-19-00104). Часть работы выполнена на оборудовании центров коллективного пользования “Состав вещества” ИВТЭ УрО РАН и “Урал-М” ИМЕТ УрО РАН.*